

## REVISIONE DEI MODELLI NUMERICI ALLA MACROSCALA PER LO STUDIO DEL FENOMENO DI INFRAGILIMENTO DA IDROGENO

Chiara Colombo<sup>a</sup>, Giorgia Gobbi<sup>a</sup>, Laura Vergani<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Politecnico di Milano - Dipartimento di Meccanica, Via La Masa 1, 20156, Milano  
e-mail: chiara.colombo@polimi.it, giorgia.gobbi@polimi.it, laura.vergani@polimi.it

### Sommario

Il fenomeno di infragilimento da idrogeno, noto da diversi anni, rimane un argomento di grande interesse scientifico. Di recente, in letteratura l'attenzione si è spostata prevalentemente sullo sviluppo di modelli numerici in grado di riprodurre il fenomeno o di chiarire e/o interpretare alcuni aspetti che lo caratterizzano. Diverse sono le scale dimensionali considerate: scala atomistica, nano, meso, macroscale. I modelli sviluppati alla macroscale sono prevalentemente modelli ad elementi finiti di tipo coesivo il cui scopo è la valutazione della resistenza meccanica di un materiale sotto effetto combinato di sollecitazione meccanica applicata e ambiente aggressivo, in particolare ricco di idrogeno atomico. Il presente lavoro propone una revisione dei modelli numerici alla macroscale presenti in letteratura al fine di riassumere lo stato dell'arte, di valutare pro e contro dei modelli presenti e individuare quali possano essere gli sviluppi futuri per l'ottimizzazione di un approccio numerico a questa scala.

### Abstract

Hydrogen embrittlement is a phenomenon well known since several years and still nowadays, it deserves great attention in the scientific research field. Recently, in literature the attention moved toward numerical models able either to reproduce this complex phenomenon or to clarify and/or interpret some characteristic aspects. Different dimensional scales are considered: atomistic scale, nano, meso and macroscale. The macroscale models mainly consist of finite cohesive element models aimed to evaluate the mechanical properties of a material under the combined effect of mechanical stress and aggressive environment, particularly rich in atomic hydrogen. The present work proposes a review of the macroscale numerical models available in literature in order to summarize the state of art, to evaluate pros and cons of the numerical models and thus to identify the possible further developments to optimize the numerical approach at this scale.

**Parole chiave:** infragilimento da idrogeno, modelli numerici, modelli coesivi, macroscale.

### 1. INTRODUZIONE

L'infragilimento da idrogeno è fenomeno complesso che interessa tutti i componenti che sono a contatto con ambienti contenenti questo elemento. L'infragilimento interessa non solo la superficie, ma si estende all'intero materiale, portando ad un degrado delle proprietà meccaniche della struttura a contatto con l'ambiente idrogenato.

Il fenomeno di infragilimento è il risultato dell'interazione di diversi fattori che possono essere classificati come (Figura 1, [1]):

- 1) ambientali, legati alla contaminazione;
- 2) meccanici, legati ai carichi applicati;
- 3) dipendenti dal materiale.

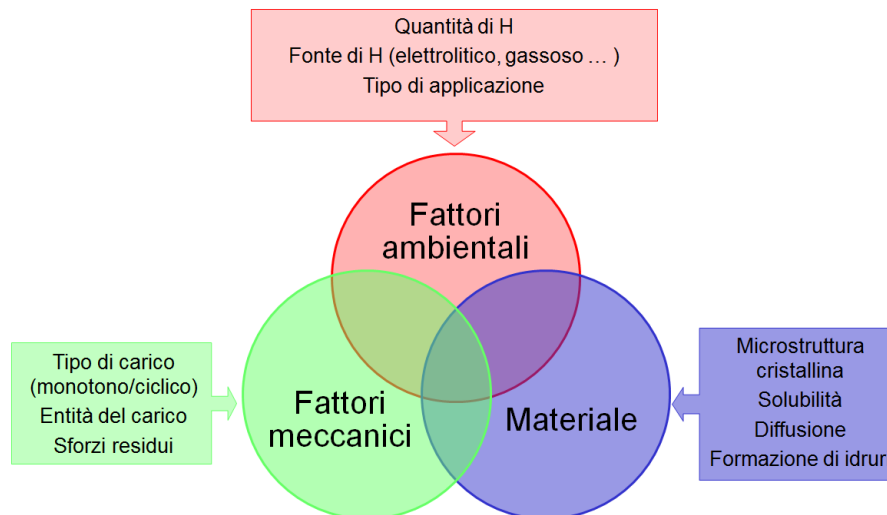


Figura 1: Schema dei fattori interagenti nel fenomeno di infragilimento da idrogeno.

Più in dettaglio, dal punto di vista ambientale le fonti da cui l'idrogeno atomico può essere sviluppato per contaminare un acciaio sono molteplici e possono essere più o meno evidenti. Per esempio, l'idrogeno può essere presente come elemento in forma gassosa, come nel caso di bombole e recipienti per lo stoccaggio e il trasporto di idrogeno gassoso [2], che oggi è tra i vettori energetici più studiati e in via di sviluppo (si pensi ad esempio alle *fuel-cells*).

L'idrogeno può anche essere un prodotto di reazioni chimiche che si sviluppano in ambienti acidi, come spesso avviene nel settore petrolifero in presenza di idrocarburi [3-6].

Altri ambienti dove la presenza di idrogeno è meno evidente sono legati alle dissociazioni chimiche che si sviluppano durante il degrado dei lubrificanti e alla loro contaminazione con acqua. Recentemente, si sono infatti verificati cedimenti di cuscinetti di supporto per turbine eoliche ([7], [8]), dove l'effetto dell'infragilimento è combinato con la fatica da contatto. Anche i giunti bullonati possono soffrire il fenomeno dell'infragilimento, legato ai trattamenti termici subiti dagli acciai da bullonatura [9]. Indipendentemente dal tipo di contaminazione, una volta che l'idrogeno in forma atomica penetra all'interno del reticolo cristallino dell'acciaio, inizia il fenomeno di diffusione e di conseguente degrado delle proprietà meccaniche.

Per quanto riguarda i fattori meccanici, l'infragilimento è chiaramente influenzato dal tipo di carico applicato al componente, statico o di fatica, come verrà commentato in seguito. Inoltre, altri fattori meccanici evidenziati dalla letteratura sono legati all'intensità del carico e all'eventuale presenza di sovraccarichi che possono accelerarlo [10], richiamando l'idrogeno atomico presente nel reticolo sulla base del complesso stato di sforzo che nasce all'apice della cricca. Infine, anche la presenza di sforzi residui che sono noti essere positivi per i materiali per sostenere carichi ciclici, in realtà sono motivo di diffusione dell'idrogeno nella struttura del componente sulla base del diverso gradiente di sforzo presente [11].

Infine, il materiale ha un ruolo chiave nel verificarsi del fenomeno di infragilimento. Questo, infatti, dipende da una serie di parametri che sono caratteristici del materiale e che non sempre sono di facile derivazione: il coefficiente di diffusione, la solubilità, e il tipo di microstruttura che influenza il quantitativo di idrogeno presente nel reticolo e nelle trappole. L'influenza di tutti questi fattori sarà commentata più in dettaglio nel seguito del lavoro.

Data la molteplicità dei fattori che concorrono al fenomeno, il problema dell'infragilimento può essere approcciato da diversi punti di vista: meccanico, chimico o fisico. Pertanto, la letteratura relativa a tale argomento è sicuramente molto vasta e comprende sia prove sperimentali, sia modelli, analitici e simulazioni numeriche.

I modelli analitici sono sicuramente molto utili per capire il fenomeno, ma molto spesso limitati nelle loro formulazioni. Tra le loro debolezze principali si possono richiamare [12]: 1) l'effetto della geometria del componente e dei gradienti di sforzo che si generano; 2) le proprietà del materiale, che non sono considerate essere dipendenti dal contenuto di idrogeno.

E' quindi evidente l'importanza di sviluppare modelli numerici che simulano nel modo più completo possibile l'infragilimento da idrogeno, soprattutto in presenza di cricche, tenendo conto sia di fattori globali che locali. Infatti, avere a disposizione modelli numerici affidabili può essere un utile punto di partenza per indirizzare le campagne sperimentali di caratterizzazione degli acciai in presenza di idrogeno, che tipicamente sono complesse soprattutto in riferimento alla carica di idrogeno nel materiale.

Per quanto riguarda i modelli numerici, una possibile classificazione può essere proposta in base alla scala dimensionale alla quale sono sviluppati. Un possibile schema è rappresentato in Figura 2.

In questo lavoro si è scelto di focalizzare l'attenzione sui lavori numerici sviluppati alla macroscale, al fine di riassumere lo stato dell'arte, di valutare pro e contro di tali modelli presenti in letteratura e di individuare quali possano essere gli sviluppi futuri per l'ottimizzazione di un approccio numerico a questa scala dimensionale.

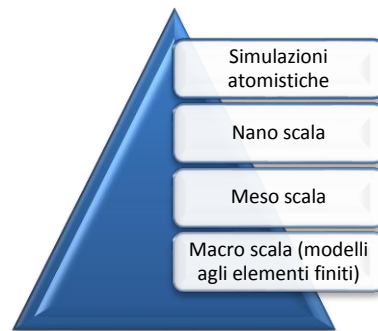


Figura 2: Schema delle scale dimensionali a cui sono stati sviluppati i modelli di simulazione dell'infragilimento da idrogeno.

## 1. I MODELLI NON COESIVI

La letteratura numerica ha sviluppato diversi approcci numerici per descrivere il fenomeno dell'accelerazione nella propagazione delle cricche sotto l'azione combinata di carichi e della presenza di idrogeno (*hydrogen assisted stress corrosion cracking*, HASCC). Il loro scopo è quello di stimare i parametri della meccanica della frattura per la progettazione di strutture criccate e per la previsione della propagazione dei difetti in presenza di idrogeno.

Uno dei primi modelli numerici che sono stati implementati in letteratura per determinare questa grandezza è quello di [12]. Gli autori immaginano che la propagazione in modo I della cricca avvenga a seguito del cedimento di una serie di provini fittizi, posizionati perpendicolarmente alla direzione di propagazione della stessa e sollecitati in modo unidirezionale, come rappresentato in Figura 3.

Ogni provino equivale ad un elemento finito, sottoposto ad una micro prova fittizia monoassiale di trazione. Il cedimento di ogni provino avviene quando la concentrazione di idrogeno raggiunge il valore critico che la microstruttura può tollerare, oppure quando si supera la massima deformazione. Una volta portato a cedimento il primo provino nella zona dell'apice della cricca, il modello ipotizza una redistribuzione dell'idrogeno presente sugli altri elementi. L'analisi è un transitorio, suddiviso in intervalli di tempo sufficientemente piccoli da simulare correttamente la velocità di trasporto dell'idrogeno e l'incremento di carico.

Questo è un approccio complesso, che richiede algoritmi di *re-meshing* durante la propagazione della cricca, poiché ogni volta che un elemento all'apice cede, viene cancellato dall'analisi. La geometria all'apice della cricca e la *mesh* presente in tale zona è infatti uno dei parametri da tenere in considerazione per simulare correttamente il richiamo di idrogeno dal cuore del materiale alla zona criccata dove è presente un alto gradiente di sforzo.

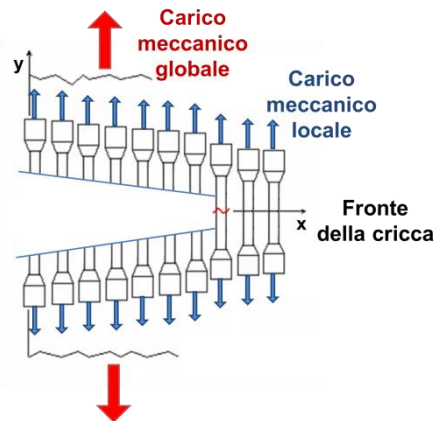


Figura 3: Schema dell'approccio di provini fittizi, proposto da [12]: propagazione della cricca come sequenza di cedimento di una serie di provini lungo il fronte.

Un altro modello numerico sicuramente complesso e sviluppato più di recente è quello del lavoro [13], che simula l'infragilimento di provini di trazione in magnesio sollecitati in controllo di deformazione. Il modello, sviluppato alle differenze finite, estrae risultati dello studio del comportamento del materiale alla mesoscala, per implementarlo a livello di macroscale. Più in dettaglio, questo modello simula il materiale come composto di fasci di fibre paralleli tra loro ed orientati parallelamente al carico applicato. Quando il materiale viene contaminato da idrogeno, la deformazione a rottura del fascio,  $\epsilon_f$ , viene ridotta esponenzialmente rispetto alla concentrazione locale di idrogeno. L'innesco e la propagazione della cricca sono quindi trattati come il risultato di una sequenza di eventi di cedimento che considerano le singole fibre.

Entrambi i due modelli citati ([12], [13]), quindi, degradano le proprietà meccaniche dei materiali in funzione del quantitativo di idrogeno, basandosi su leggi sperimentali o tarate sulla base del comportamento stesso dell'acciaio infragilito. Anche il modello di [14], che presenta una simulazione tridimensionale, si basa su considerazioni simili. Le analisi esplicite di questo lavoro presentano l'effetto dell'idrogeno in una struttura policristallina, considerando carichi di fatica ed includendo l'effetto della plasticità ciclica e del degrado delle proprietà meccaniche a bordo grano. Le analisi sono multi-scala e spaziano dal singolo cristallo alla macroscale di un provino DCB.

Infine, un ultimo approccio alla macroscale interessante tra quelli proposti in letteratura è quello di [6], che analizza una cricca interna in acciai per condotte petrolifere, in ambiente aggressivo contenente  $H_2S$  e dove si sviluppa idrogeno. Le simulazioni si focalizzano sull'idrogeno accumulato all'interno della cavità della cricca, analizzando sia analiticamente che numericamente la diffusione di idrogeno e gli sforzi generati dalla pressione di idrogeno stessa. Gli autori hanno osservato che la propagazione di tali cricche è principalmente governata dalla tenacità, dal pH e dalla posizione della cricca.

## 2. I MODELLI COESIVI

Recentemente, i modelli che in letteratura stanno avendo maggior diffusione sono i cosiddetti “modelli coesivi” (*Cohesive Zone Models*, *CZM*). In generale, con tale designazione si raggruppano tutti i modelli che utilizzano elementi coesivi per simulare un danneggiamento, come per esempio la propagazione di una cricca. La legge costitutiva che riproduce il comportamento del materiale negli elementi coesivi è definita attraverso una legge di trazione-separazione (*Traction-Separation Law*, *TSL*).

Si tratta di una curva sforzo-spostamento che simula fenomenologicamente la separazione delle facce della cricca. Tale legge, infatti, non è legata a nessun parametro fisico, ma piuttosto è un semplice mezzo per descrivere la sollecitazione coesiva in corrispondenza dell'apice. Pertanto, questo approccio si presta ad essere utilizzato con diversi tipi di materiali fragili e duttili. In base al materiale con cui si lavora la TSL presenta formulazioni diverse (Figura 4). Questo conferisce grande flessibilità e versatilità. Inoltre, un ulteriore punto di forza dei modelli coesivi è che offrono la possibilità di raggruppare in un'unica simulazione sia l'innesco che la propagazione della cricca. Per contro, utilizzare questi elementi significa che la direzione di propagazione della cricca deve essere nota a priori. Inoltre, essendo la legge coesiva fenomenologica c'è sempre bisogno di tarare i parametri che la caratterizzano con risultati sperimentali per poter simulare correttamente il comportamento meccanico del materiale analizzato.

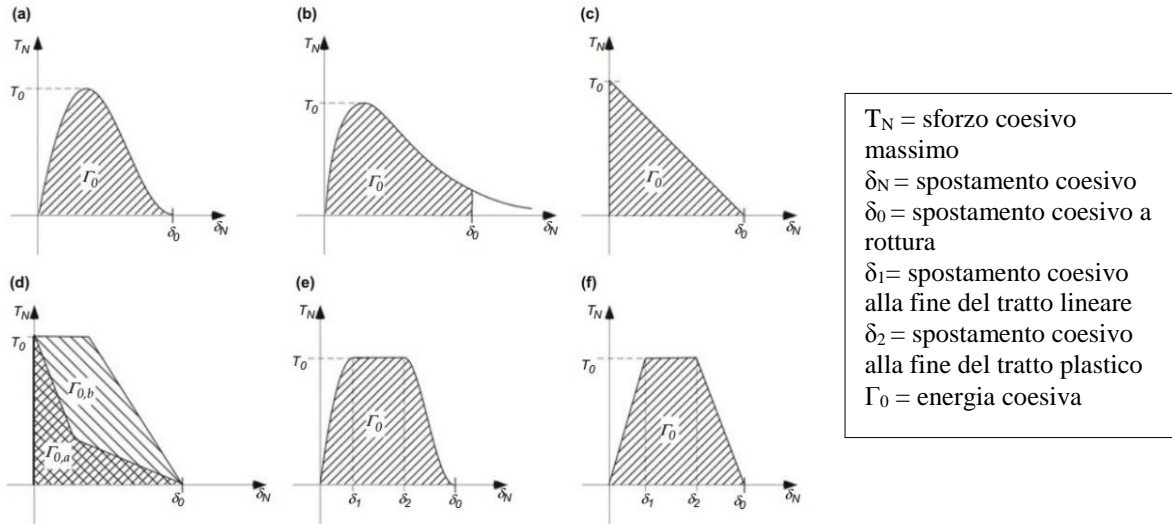


Figura 4: Alcuni esempi di TSL proposte in letteratura [15].

L'idea fondamentale alla base dei modelli coesivi è stata proposta da Dugdale [16] e da Barenblatt [17]. Dugdale [16] utilizzò questo modello per descrivere analiticamente la deformazione plastica vicino all'apice di una cricca per cui lo sforzo in direzione normale era limitato dal valore di snervamento di un materiale con plasticità ideale. La sua applicazione come modello di frattura è avvenuta in seguito, ed è poi stata sviluppata all'interno del metodo di analisi ad elementi finiti. Anche Barenblatt [17], sulla base di osservazioni sperimentali, suggerì una legge di trazione e separazione di decoesione di un reticolo atomico per evitare la singolarità all'apice della cricca.

Nel caso specifico di simulazioni di propagazione in presenza di idrogeno, l'analisi coesiva viene affiancata da un'analisi di diffusione, per valutare la concentrazione di idrogeno locale all'apice della cricca. Sulla base della concentrazione di idrogeno, si ridimensiona la legge di trazione-separazione che governa gli elementi coesivi, in modo da ridurre la resistenza meccanica del materiale a propagazione e simulare così l'effetto infragilente dell'idrogeno. Le equazioni utilizzate per ridurre la TSL sono:

$$\frac{\sigma_c(\theta)}{\sigma_c} = 1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2 \quad [18] \quad (1)$$

$$\theta = \frac{C}{C + \exp(-\Delta g_b^0/RT)} \quad [19] \quad (2)$$

dove:  $\sigma_c(\theta)$  è lo sforzo coesivo calcolato correntemente,  $\sigma_c$  è lo sforzo coesivo massimo ammissibile, il rapporto  $\sigma_c(\theta)/\sigma_c$  è l'energia coesiva,  $\theta$  è un fattore che rappresenta la copertura di idrogeno nel reticolo del materiale,  $C$  è la concentrazione totale di idrogeno all'interno dell'acciaio,  $\Delta g_b^0$  è l'energia libera di Gibbs,  $R$  è la costante universale dei gas e  $T$  è la temperatura.

Il lavoro [20] è tra i primi ad utilizzare un approccio numerico basato sulle Eq. (1) e (2) all'interno di una simulazione numerica, con decoesione all'interfaccia tra una inclusione e la matrice in lega di nichel. Anche [18] presenta una simulazione con decoesione di una cricca centrale in una piastra, con propagazione intermittente dovuta alla differenza di tempo che richiede l'idrogeno per diffondere verso la zona coesiva.

Più recentemente si sono sviluppati modelli per studiare la diffusione dell'idrogeno in funzione dello sforzo idrostatico, della deformazione plastica e della velocità di deformazione. [21] e [22] hanno proposto la propagazione di una cricca in un provino C(T) considerando sia la diffusione che aspetti legati al comportamento meccanico. La convalida del modello è proposta sulla base delle curve di spostamento del provino in direzione del carico in funzione della lunghezza della cricca.

I modelli più recenti considerano inoltre un ulteriore aspetto legato al calcolo della concentrazione di idrogeno. Questa, infatti, si compone di due contributi: la concentrazione interstiziale,  $C_L$ , ovvero l'idrogeno diffusibile che si muove all'interno del reticolo attraverso i siti interstiziali per effetto dello sforzo idrostatico e la concentrazione di idrogeno intrappolato in siti ad alta energia di legame,  $C_T$ .

Quest'ultima, strettamente legata alla microstruttura del materiale, è una componente non facile da definire. Pertanto, per semplificare il problema, in questi modelli si assume che l'unica fonte di trappole siano le dislocazioni presenti nel materiale. Si utilizzano, quindi, relazioni che permettono di legare la concentrazione di idrogeno intrappolato,  $C_T$ , con la deformazione plastica,  $\varepsilon_p$ , grandezza calcolabile durante l'analisi. Finora le relazioni utilizzate nei modelli presenti in letteratura sono due. La prima è stata derivata da [23] sulla base dei risultati ottenuti precedentemente da [24] ed è così espressa:

$$C_T = (49.0 \cdot \varepsilon_p + 0.1) \cdot C_L \quad (3)$$

La seconda invece include la densità di siti interstiziali,  $N_L$ , una costante di equilibrio,  $K_T$ , e la densità di trappole,  $N_T$ . Questa a sua volta dipende dalla deformazione plastica secondo [25]:

$$C_T = \frac{N_T K_T C_L}{K_T C_L + N_L} \quad (4)$$

con:

$$\log N_T = 23.26 - 2.33 \exp(-5.5 \varepsilon_p) \quad (5)$$

Per tenere in considerazione questo aspetto legato alla concentrazione, [23] propone un modello costituito da tre analisi svolte una in seguito all'altra in cui si calcolano rispettivamente: 1) il valore dello sforzo idrostatico, 2) la concentrazione di idrogeno diffusibile,  $C_L$  e 3) la concentrazione di idrogeno intrappolato,  $C_T$ , che permette di risalire alla concentrazione totale e di applicare le Eq. 1 e 2 alla curva *TSL*.

In particolare, un primo modello è presentato in [23] per un provino rettangolare intagliato a trazione, di acciaio inossidabile 25% Cr. Per questo primo approccio gli autori propongono una legge coesiva di tipo lineare che sembra consentire di raggiungere buoni risultati se confrontati con i risultati sperimentali.

Nel lavoro [26], gli stessi autori implementano successivamente una legge di trazione e separazione polinomiale. Le due leggi coesive, lineare e polinomiale, sono confrontate applicando il modello a provini di trazione con intaglio a U e a V. Lo sforzo coesivo locale e il tempo richiesto per l'inizio della frattura sono analizzati in funzione della forma della legge di trazione e separazione e della dimensione degli elementi. I risultati ottenuti dal modello numerico sono messi a confronto con i dati sperimentali di prove di trazione valutando soprattutto l'idoneità a stimare l'inizio della propagazione. Viene messo in luce che la legge polinomiale e una *mesh* più fitta (fino a 0.5  $\mu\text{m}$ ) permettono di descrivere più accuratamente il campo dello sforzo coesivo locale.

Un modello simile è stato sviluppato anche dal nostro gruppo di lavoro ([27], [28]), simulando delle prove di tenacità su provini C(T).

Il lavoro [29] propone lo studio di un ulteriore acciaio, X70, in presenza di idrogeno considerando tre diverse configurazioni: materiale base, materiale termicamente trattato in modo da simulare la zona termicamente alterata di una saldatura e il materiale saldato. Anche in questo caso i risultati del modello numerico sono confrontati con i risultati sperimentali ottenuti da prove di meccanica della frattura effettuate su provini caricati per via elettrolitica. Sulla base del confronto con i dati sperimentali vengono forniti i valori dei parametri coesivi che meglio permettono di individuare l'inizio della propagazione per tutte e tre le configurazioni considerate e per questo tipo di acciaio.

Per lo stesso materiale X70 in forma termicamente alterata è stato proposto anche il modello 3D [30], [31]. La prova simulata è un prova di trazione su un provino di tipo *single edge notch*. La calibrazione dei parametri coesivi è avvenuta sempre per confronto con i dati sperimentali e i risultati ottenuti dal modello sono stati confrontati con i dati ottenuti dal modello 2D in deformazione piana. A parità di sollecitazione sull'area netta, con il modello 3D si sono trovati valori più alti di sforzo di apertura, di deformazione plastica locale all'apice della cricca e di concentrazione interstiziale calcolata nell'analisi di diffusione.

Un approccio differente rispetto a quello dei precedenti lavori, costituito dalle tre analisi effettuate in successione tra loro, è proposto da [32]. Questo lavoro presenta una nuova strategia che combina una parte analitica che simula la diffusione, ed una parte ad elementi finiti (FE) per l'analisi dello stato di sforzo. Il processo di diffusione è risolto attraverso un modello analitico mono e bidimensionale. La soluzione analitica viene poi utilizzata in un modello coesivo ad elementi finiti bidimensionale per valutare la propagazione di una cricca in ambiente idrogenato. I risultati ottenuti vengono confrontati con i dati sperimentali presenti in letteratura [21]. Oltre ad un buon *fitting* dei dati sperimentali, questa procedura consente di ridurre il tempo di simulazione rispetto ad un modello ad elementi finiti che include sia analisi di diffusione che di propagazione.

## 2.1 Simulazioni simultanee di diffusione e di analisi dello sforzo

L'approccio numerico di effettuare analisi in successione, non simultanee tra di loro, è limitativo soprattutto quando si vogliono simulare dei fenomeni di fatica, in cui la posizione dell'apice varia nel tempo. Per affrontare questi problemi, si è cercato quindi in letteratura di simulare diffusione e analisi di sforzo collegandole tra loro, simultaneamente, in un unico *step* di simulazione. Infatti, da un punto di vista fisico, il fenomeno di diffusione di idrogeno è strettamente legato allo stato di sforzo che si crea in un materiale soggetto ad un carico esterno, in particolare alla componente idrostatica che guida la diffusione dell'idrogeno interstiziale nel reticolo. Questi due campi si influenzano dunque reciprocamente.

Molto spesso, tuttavia, in alcuni pacchetti commerciali di codici ad elementi finiti, l'accoppiamento di questo tipo di analisi non è implementato (ad esempio *Abaqus*). Piuttosto, è invece spesso presente l'accoppiamento tra analisi di diffusione di calore e di deformazione. Matematicamente, le equazioni di diffusione di calore e massa sono identiche. Pertanto, sfruttando l'analogia tra le due equazioni (Tabella 1) è possibile creare un modello accoppiato.

Tabella 1: Confronto tra equazione di diffusione di calore e massa e parametri caratteristici [33].

	Equazione del calore	Equazione di diffusione di massa
	$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_q + r_q = 0$	$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_m + r_m = 0$
Grado di libertà	$T$ (K)	$C$ (g/mol)
Flusso di calore/massa	$\vec{J}_q$ (W/m <sup>2</sup> )	$\vec{J}_m$ (g.m/mol/s)
Sorgente interna di calore/massa	$r_q$ (W/m <sup>3</sup> )	$r_m$ (g/mol/s)

In realtà, le equazioni che governano il problema di infragilimento da idrogeno non sono semplicemente quelle riportate in Tabella 1. Infatti, il legame tra concentrazione dei siti trappola e deformazione plastica in questo caso è definito dalle Eq. (4) e (5) che devono essere implementate dall'utente in apposite subroutine che consentono di risolvere il problema calcolando tutti i campi desiderati simultaneamente. Questo approccio è stato suggerito da **Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.** e sviluppato molto più in dettaglio in [33] e [35]. In questi lavori, a partire da risultati sperimentali, gli autori sviluppano un modello numerico in grado di valutare la vita a fatica di un componente operante in atmosfera satura di idrogeno. In particolare, il modello rappresenta un provino C(T) di acciaio inossidabile martensitico, 15-5P, caricato con idrogeno in alta pressione. Gli elementi coesivi impiegati per simulare la cricca sono governati da una legge di trazione e separazione definita in modo da considerare l'influenza del carico ciclico sulla propagazione della cricca e la concentrazione di idrogeno locale all'apice. Sfruttando l'analogia con l'equazione del calore si calcolano, simultaneamente allo stato di sforzo (campo idrostatico), anche le grandezze necessarie per il calcolo della concentrazione di idrogeno intrappolato assunto come negli altri modelli macroscopici associato alla deformazione plastica. Sulla base della concentrazione di idrogeno totale la legge di trazione e separazione è modificata per simulare l'effetto infragilente dell'idrogeno sulla base delle relazioni espresse in Eq. (2) e (3). I risultati ottenuti dal modello numerico confermano i dati sperimentali ottenuti dalle prove di fatica.

Questi lavori di recente pubblicazione sono tra i più avanzati in letteratura relativamente alla simulazione numerica di acciai in presenza di idrogeno, perché mostrano la possibilità di accoppiare le simulazioni e di effettuare il calcolo della diffusione di idrogeno e dello sforzo in parallelo fra loro.

## CONCLUSIONI

Questo lavoro riassume lo stato dell'arte dei modelli numerici alla macroscale relativi all'infragilimento da idrogeno. In particolare, sono stati evidenziati aspetti positivi e negativi di ogni approccio, per fornire una base di partenza nello sviluppo di possibili futuri modelli numerici sempre più complessi.

Infatti, un modello numerico ideale alla macroscale dovrebbe riassumere relazioni implementate su scale dimensionali inferiori, a partire da monocristalli fino ad arrivare agli acciai. La direzione che la letteratura scientifica sta prendendo è proprio questa, ma ancora molto lavoro deve essere impiegato nella ricerca delle equazioni che governano il fenomeno dell'infragilimento da idrogeno e nello sviluppo di legami tra le diverse scale dimensionali.

Al momento, i modelli coesivi basati sulle leggi di trazione-separazione sembrano i più versatili, benché l'operazione di calibrazione di queste leggi richieda anch'essa un notevole sforzo computazionale. Questi modelli sono sicuramente migliorabili, e una direzione è proprio quella suggerita nel finale del lavoro, con l'accoppiamento delle equazioni di diffusione e di analisi dello stato di sforzo.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Barnoush, H. Vehoff, "Recent developments in the study of hydrogen embrittlement: Hydrogen effect on dislocation nucleation", *Acta Materialia*, 58, 5274-5285 (2010).
- [2] J. Zheng, X. Liu, P. Xu, P. Liu, Y. Zhao, J. Yang, "Development of high pressure gaseous hydrogen storage technologies", *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 1048-1057 (2012).
- [3] P. Fassina, F. Bolzoni, G. Fumagalli, L. Lazzari, L. Vergani, A. Sciuccati, "Influence of hydrogen and low temperature on mechanical behaviour of two pipeline steels", *Engineering Fracture Mechanics*, 81, 43-55 (2012).
- [4] L. Vergani, A. Sciuccati, C. Colombo, F. Bolzoni, "Hydrogen embrittlement and low temperature effects on carbon steels", in: *International Hydrogen Conference (IHC 2012): Hydrogen-Materials Interactions*, B.P. Somerday, P. Sofronis (Ed.), Chapter 34, 319-328 (2014).
- [5] L. Vergani, A. Sciuccati, C. Colombo, "A model to predict the hydrogen effect on crack growth rate in high-strength steels", in: *International Hydrogen Conference (IHC 2012): Hydrogen-Materials Interactions*, B.P. Somerday, P. Sofronis (Ed.), Chapter 36, 339-346 (2014).
- [6] A. Traidia, M. Alfano, G. Lubineau, S. Duval, A. Sherik, "An effective finite element model for the prediction of hydrogen induced cracking in steel pipelines", *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 16214-16230(2012)
- [7] M.-H. Evans, A.D. Richardson, L. Wang, R.J.K. Wood, "Serial sectioning investigation of butterfly and white etching crack (WEC) formation in wind turbine gearbox bearings", *Wear*, 302 1573-1582 (2013).
- [8] M. Kohara, T. Kawamura, M. Egami, "Study on mechanism of hydrogen generation from lubricants", *Tribology Transactions*, 49, 53-60 (2006).
- [9] A.K. Jha, P. Ramesh Narayanan, K. Sreekumar, M.C. Mittal, K.N. Ninan, "Hydrogen embrittlement of 3.5Ni-1.5Cr-0.5Mo steel fastener", *Engineering Failure Analysis*, 15, 431-439, (2008).
- [10] P.S. Song, Y.L. Shieh, "Fracture lifetime of hydrogen-charged AISI 4130 alloy steel under intermittent sustained overloads", *Engineering Fracture Mechanics*, 71, 1577-1584 (2004).
- [11] B.E. Wilde, I. Chattoraj, "The effect of shot peening on hydrogen absorption by and hydrogen permeation through AISI 4130 steels", *Scripta Metallurgica et Materialia*, 26, 627-632 (1992).
- [12] T. Boellinghaus, H. Hoffmeister, "Numerical model for hydrogen-assisted cracking", *Corrosion*, 56, 611-22 (2000).
- [13] W. Dietzel, M. Pfuff, N. Winzer, "Testing and mesoscale modelling of hydrogen assisted cracking of magnesium", *Engineering Fracture Mechanics*, 77, 257-263 (2010).



- [14] J. Rimoli, M. Ortiz, “A three-dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking”, *Philosophical Magazine*, 90, 2939–2963 (2010).
- [15] K.H. Schwalbe, I. Scheider, A. Cornec, *Guidelines for applying cohesive models to the damage behaviour of engineering materials and structures*, Chapter 2, ed. Springer, 2013.
- [16] D.S. Dugdale, “Yielding of steel sheets containing slits”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8, 100–104 (1960).
- [17] G.I. Barenblatt, “The mathematical theory of equilibrium of crack in brittle fracture”, *Advances in Applied Mechanics*, 7, 55–129 (1962).
- [18] S. Serebrinsky, E. A. Carter, M. Ortiz, “A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, 2403–2430 (2004).
- [19] E.D. Hondros, M.P. Seah, “The theory of grain boundary segregation in terms of surface adsorption analogues”, *Metallurgical Transactions*, 8A, 1363–71 (1977).
- [20] Y. Liang, P. Sofronis, “Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51, 1509–1531 (2003).
- [21] I. Scheider, M. Pfuff, W. Dietzel, “Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model”, *Engineering Fracture Mechanics*, 75, 4283–4291 (2008).
- [22] R. Falkenberg, W. Brocks, W. Dietzel, I. Scheider, “Modelling the effect of hydrogen on ductile tearing resistance of steels”, *International Journal of Materials Research (Zeitschrift fuer Metallkunde)*, 101, 989–996 (2010).
- [23] V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen, E. Øtby, T. Berstad, “Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25%Cr duplex stainless steel”, *Engineering Fracture Mechanics*, 75, 2333–2351 (2008).
- [24] A. Taha, P. Sofronis, “A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement”, *Engineering Fracture Mechanics*, 68, 803–837 (2001).
- [25] A.J. Kumnick, H.H. Johnson, “Deep trapping states for hydrogen in deformed iron”, *Acta Materialia*, 28, 33–39 (1980).
- [26] V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen, “Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels”, *Materials and Design*, 29, 1934–1948 (2008).
- [27] G. Gobbi, C. Colombo, S. Miccoli, L. Vergani, “A numerical model to study the hydrogen embrittlement effect”, *Procedia Engineering*, 74, 460–463 (2014).
- [28] C. Colombo, G. Gobbi, L. Vergani, “Studio numerico del comportamento meccanico di un acciaio in presenza di idrogeno”, Lavoro 337, Atti del 43° Convegno nazionale AIAS, 19-12 Settembre 2014, Rimini.
- [29] V. Olden, A. Alvaro, O.M. Akselsen, “Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint - Experiments and FE simulations”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 11474–11486 (2012).
- [30] A. Alvaro, V. Olden, O.M. Akselsen, “3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 38, 7539–7549 (2013).
- [31] A. Alvaro, V. Olden, O.M. Akselsen, “3D cohesive modelling of hydrogen embrittlement in the heat affected zone of an X70 pipeline steel – Part II”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 39, 3528–3541 (2014).
- [32] N.R. Raykar, S.K. Maiti, R.K. Singh Raman, “Modelling of mode-I stable crack growth under hydrogen assisted stress corrosion cracking”, *Engineering Fracture Mechanics*, 78, 3153–3165 (2011).
- [33] C. Moriconi, “Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l’hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques”, Tesi di Dottorato, (2012).
- [34] C.S. Oh, Y.J. Kim, K.B. Yoon, “Coupled analysis of hydrogen transport using Abaqus”, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, 4, 908–917 (2010).
- [35] C. Moriconi, G. Hénaff, D. Halm, “Cohesive zone modeling of fatigue crack propagation assisted by gaseous hydrogen in metals”, *International Journal of Fatigue*, 68, 56–66 (2014).